

二核高スピンコバルト(II)錯体の磁性に及ぼす

ローカルな歪み軸の傾きの影響

○崎山 博史

山形大学理学部物質生命化学科(〒990-8560 山形市小白川町 1-4-12)

【緒言】

二核正八面体型高スピンコバルト(II)錯体の磁気的性質を解釈することは、軌道角運動量の寄与のために困難である。しかし近年のコンピュータ技術の発展のおかげで、三つの問題点(ローカルなスピン軌道相互作用の問題、コバルト周りのひずみの問題、交換相互作用の異方性の問題)を解決し、磁気的性質の解釈が可能になってきた[1, 2]。しかし二つのコバルト周りのひずみ方向(歪み軸)の相対的な位置関係の影響についてはまだ十分考慮されていない。そこで今回、歪み軸の傾きの影響を考慮した磁化率の理論式を導いき、歪み軸の傾きと磁気的性質の関係について考察した。

【方法】

計算は Power Macintosh 7300/180 (OS J1-7.5.5) および Macintosh iBook (Mac OS 9.2) でおこなった。

【結果】

コバルト周りのひずみの方向(歪み軸)を表すために二つの角 ϕ と ψ を定義し(図1)、磁化率の理論式を導いた。これによって歪み軸の傾きの影響を考慮して磁化率の温度変化をシミュレートすることができるようになった。例として yz 平面内で歪み軸が傾いた場合の磁化率の温度変化を図2に示す。ここでは反強磁性的相互作用

を仮定したが、歪み軸の傾き角の影響で低温部分の磁化率が大きく変化することが示された。

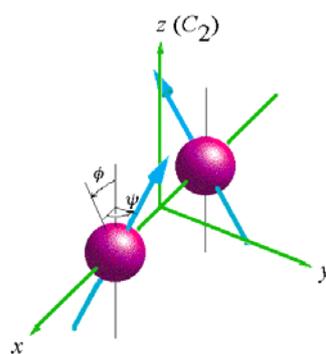
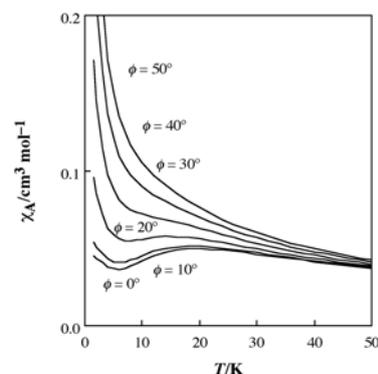


図1 歪み軸の定義

図2 磁化率の温度変化に及ぼす ϕ の影響

参考文献

- 1 H. Sakiyama, R. Ito, H. Kumagai, K. Inoue, M. Sakamoto, Y. Nishida, and M. Yamasaki, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2001, 2027-2032; *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2001, 2705.
- 2 H. Sakiyama, *Inorg. Chim. Acta*, 2006, **359**, 2097-2100; *Inorg. Chim. Acta*, 2007, **360**, 715-716.